



دانشگاه فردوسی مشهد

گروه مهندسی مکانیک

عنوان پایان نامه

تحلیل رفتار بیو نانو ساختار پریفولدین $\beta 1$ ، با اعمال نیروهای مکانیکی خارجی و قیود حرکتی و

پیشنهاد آن بعنوان المان فیزیکی در ساخت بیو نانو رباتها

محمد عسکریان

ارائه شده جهت اخذ درجه کارشناسی ارشد

مهندسی مکانیک-طراحی کاربردی

استاد راهنما

دکتر مجید معاونیان

شهریور ۹۱

فهرست مطالب

۲	فصل اول:مقدمه
۲	۱.۱ نانو رباتیک
۵	۱.۲ بیو نانو رباتیک
۷	۱.۳ ماشین های مولکولی با المان های پروتئینی
۷	۱.۳.۱ موتور مولکولی ATP synthase
۹	۱.۳.۲ موتور مولکولی خطی مایوسین
۹	۱.۳.۳ موتور مولکولی کینسین
۱۰	۱.۳.۴ موتور مولکولی داینین
۱۰	۱.۳.۵ موتور های مولکولی با بنیان DNA
۱۱	۱.۴ طراحی و کنترل بیو نانو رباتها
۱۱	۱.۴.۱ طراحی سیستم های بیو نانو رباتیک
۱۳	۱.۴.۲ کنترل سیستم های بیو نانو رباتیک
۱۳	۱.۵ بیو نانو رباتها در مقایسه با ماکرو رباتها
۱۶	فصل دوم:پروتئین ها
۱۷	۲.۱ اسید های آمینه
۱۸	۲.۲ تا شدگی پروتئین ها
۱۹	۲.۳ پریفولدین $\beta 1$
۲۳	فصل سوم:مبانی شبیه سازی دینامیک مولکولی
۲۳	۳.۱ دینامیک مولکولی کلاسیک
۲۴	۳.۲ دینامیک مولکولی هدایت شده

۲۵ شبیه سازی کرات نرم
۲۵ الگوریتم های شبیه سازی
۲۷ مرحله آغازین
۲۸ گام تعادل
۲۹ گام تولید
۳۰ نرم افزار های شبیه سازی
۳۲ فصل چهارم: شبیه سازی پریفولدین $\beta 1$ با استفاده از نرم افزار گرومکس
۳۲ مدل سازی و شبیه سازی
۳۳ مراحل شبیه سازی دینامیک مولکولی هدایت شده پریفولدین $\beta 1$ در GROMACS
۳۴ نرم افزار Pymol
۳۵ ایجاد توپولوژی
۳۶ ایجاد باکس مدل
۳۷ انتخاب پارامتر ها و اجرای مرحله Energy Minimization
۳۹ انتخاب پارامتر ها و اجرای مرحله اعمال قید مکانی به پروتئین و حرکت دادن آب
۴۰ انتخاب پارامتر های اساسی شبیه سازی برای Run نهایی
۴۳ اجرای نهایی برنامه شبیه سازی
۴۶ فصل پنجم: نتایج شبیه سازی پریفولدین $\beta 1$ با اعمال قيود حرکتی
۴۶ معیار های اساسی مرتبط با شکل و ابعاد نانو محموله ها
۴۶ مساحت باز یا بسته شده دهانه پریفولدین $\beta 1$
۴۷ رفتار شاخکها در طول فرآیند اعمال نیروی مکانیکی
۴۷ تغییرات میزان انعطاف پذیری شاخکهای مارپیچ

۴۹	۵.۲ شبیه سازی اول
۵۰	۵.۲.۱ تغییرات مساحت دهانه پریفولدین $\beta 1$
۵۱	۵.۲.۲ تغییرات فواصل بین شاخکها
۵۳	۵.۲.۳ جذر مربع نوسانات ساختاری
۵۳	۵.۳ شبیه سازی دوم
۵۵	۵.۳.۱ تغییرات مساحت دهانه پریفولدین $\beta 1$
۵۶	۵.۳.۲ تغییرات فواصل بین شاخکها
۵۸	۵.۳.۳ جذر مربع نوسانات ساختاری (Rmsf)
۵۹	۵.۴ شبیه سازی سوم
۶۰	۵.۴.۱ تغییرات مساحت دهانه پریفولدین $\beta 1$
۶۱	۵.۴.۲ تغییرات فواصل بین شاخکها
۶۳	۵.۴.۳ جذر مربع نوسانات ساختاری (Rmsf)
۶۳	۵.۵ تغییرات عددی مساحت چند ضلعی تعریف شده بر روی ساختار پروتئینی
۶۴	۵.۶ نتیجه گیری و بحث
۶۷	فصل ششم: نتایج شبیه سازی های پریفولدین $\beta 1$ بدون اعمال قيود حرکتی
۶۷	۶.۱: مکانیزم اعمال نیرو در شبیه سازی های سری دوم (بدون قید حرکتی)
۷۱	۶.۲: مساحت دهانه پریفولدین $\beta 1$
۷۲	۶.۲.۱ نتیجه گیری
۷۳	۶.۳ تغییرات فواصل بین شاخکها
۷۷	۶.۳.۱: نتیجه گیری
۷۷	۶.۴: میزان انعطاف پذیری بازوهای مارپیچ

۷۹ نتیجه گیری	۶.۴.۱
۸۱ فصل هفتم: نتیجه گیری نهایی و پیشنهادات	
۸۱ ۷.۱ : درجات آزادی بیو نانو ساختار پریفولدین $\beta 1$	
۸۲ ۷.۲ : پیشنهادات	
۸۵ مراجع	

فهرست شکل ها

- شکل ۱.۱: بیو نانو ربات ساخته شده با مونتاژ المانهای طبیعی ۶
- شکل ۱.۲: بیو نانو رباتیک و علوم مختلف ۶
- شکل ۱.۳: ساختار پایه ATPase که جریان پروتون در دو موتور F_1 و F_0 را نشان می دهد ۸
- شکل ۱.۴: آزمایش تجربی بر روی F_1 -ATPase ۸
- شکل ۱.۵: موتور مولکولی مایوسین ۹
- شکل ۱.۶: موتور مولکولی کینسین ۹
- شکل ۱.۷: موتور مولکولی داینین ۱۰
- شکل ۱.۸: مسیر تعریف شده جهت پروژه طراحی بیو نانو ربات ۱۲
- شکل ۱.۹: مقایسه برخی المان های اولیه در ساخت بیو نانو ربات و ماکرو ربات ۱۴
- شکل ۲.۱: ساختار کلی اسید های آمینه ۱۷
- شکل ۲.۲: چهار ساختار اصلی پروتئین ها ۱۸
- شکل ۲.۳: پروتئین پیش و پس از تاشدن ۱۹
- شکل ۲.۴: ساختار استاندارد β Prefoldin ۲۱
- شکل ۳.۱: مبانی اولیه دینامیک مولکولی کلاسیک ۲۴
- شکل ۳.۲: تابع پتانسیل مطلوب تعریف شده برای محیط مجازی ۲۶
- شکل ۳.۳: بر همکنش های مختلف در توابع پتانسیل ۲۶
- شکل ۳.۴: مراحل الگوریتم شبیه سازی ۲۷
- شکل ۳.۵: مراحل مختلف گام آغازین ۲۸
- شکل ۳.۶: عملکرد الگوریتم عددی ۲۹
- شکل ۳.۷: پارامتر های نظارت بر تعادل سیستم ۲۹
- شکل ۴.۱: نمونه ای از مدل ایجاد شده برای سیستم واقعی ۳۳
- شکل ۴.۲: ساختار کریستالی پریفولدین β ۳۴

- شکل ۴.۳ : باکس های معروف مورد استفاده در شبیه سازها..... ۳۶
- شکل ۴.۴ : شماتیک مکانیزم اعمال نیروی مکانیکی به پروتئین ۴۱
- شکل ۴.۵ : مکانیزم های مختلف اعمال نیرو(آبی و قرمز یک جفت گروه اتمی هستند) ۴۲
- شکل ۴.۶ : ورودی و خروجی الگوریتم شبیه سازی ۴۴
- شکل ۵.۱ : مساحت تعریف شده بر روی ساختار پریفولدین $\beta 1$ بعنوان یک پارامتر دینامیکی متغیر ۴۷
- شکل ۵.۲ : محاسبه RMSF ۴۸
- شکل ۵.۳ : مکانیزم اعمال نیروی خارجی در شبیه سازی اول ۴۹
- شکل ۵.۴ : تغییرات ساختار پریفولدین $\beta 1$ بعد از شبیه سازی اول (سبز ساختار اولیه است) ۵۰
- شکل ۵.۵ : تغییرات هندسی دهانه پریفولدین $\beta 1$ در طول شبیه سازی اول ۵۱
- شکل ۵.۶ : تغییرات زمانی فواصل بین شاخکها در طول شبیه سازی اول ۵۲
- شکل ۵.۷ : RMSF المان پریفولدین $\beta 1$ در طول شبیه سازی اول ۵۳
- شکل ۵.۸ : مکانیزم اعمال نیروی خارجی در شبیه سازی دوم ۵۴
- شکل ۵.۹ : تغییرات ساختار پریفولدین $\beta 1$ بعد از شبیه سازی دوم (سبز ساختار اولیه است) ۵۵
- شکل ۵.۱۰ : تغییرات هندسی دهانه پریفولدین $\beta 1$ در طول شبیه سازی دوم ۵۶
- شکل ۵.۱۱ : تغییرات زمانی فواصل بین شاخکها در طول شبیه سازی دوم ۵۷
- شکل ۵.۱۲ : RMSF المان پریفولدین $\beta 1$ در طول شبیه سازی دوم ۵۸
- شکل ۵.۱۳ : مکانیزم اعمال نیروی خارجی و گرو ههای مقید در شبیه سازی سوم ۵۹
- شکل ۵.۱۴ : تغییرات ساختار پریفولدین $\beta 1$ بعد از شبیه سازی سوم (سبز ساختار اولیه است) ۶۰
- شکل ۵.۱۵ : تغییرات هندسی دهانه پریفولدین $\beta 1$ در طول شبیه سازی سوم ۶۱
- شکل ۵.۱۶ : تغییرات زمانی فواصل بین شاخکها در طول شبیه سازی سوم ۶۲
- شکل ۵.۱۷ : RMSF المان پریفولدین $\beta 1$ در طول شبیه سازی سوم ۶۳
- شکل ۵.۱۸ : تغییرات عددی مساحت چهار ضلعی ACBD در هر سه شبیه سازی ۶۴
- شکل ۶.۱ : مکانیزم اعمال نیروی خارجی در شبیه سازی اول ۶۸
- شکل ۶.۲ : مکانیزم اعمال نیروی خارجی در شبیه سازی دوم ۶۸

- شکل ۶.۳ : مکانیزم اعمال نیروی خارجی در شبیه سازی سوم..... ۶۹
- شکل ۶.۴ : تغییرات ساختار پریفولدین $\beta 1$ بعد از شبیه سازی اول (سبز ساختار اولیه است)..... ۷۰
- شکل ۶.۵ : ساختار پریفولدین $\beta 1$ بعد از شبیه سازی دوم (سبز ساختار اولیه است)..... ۷۰
- شکل ۶.۶ : ساختار پریفولدین $\beta 1$ بعد از شبیه سازی سوم (سبز ساختار اولیه است)..... ۷۰
- شکل ۶.۷ : تغییرات هندسی دهانه پریفولدین $\beta 1$ در طول شبیه سازی اول..... ۷۱
- شکل ۶.۸ : تغییرات هندسی دهانه پریفولدین $\beta 1$ در طول شبیه سازی دوم..... ۷۱
- شکل ۶.۸ : تغییرات هندسی دهانه پریفولدین $\beta 1$ در طول شبیه سازی سوم..... ۷۲
- شکل ۶.۹ : تغییرات عددی مساحت چهار ضلعی ACBD در هر سه شبیه سازی..... ۷۳
- ۶.۱۰ : تغییرات زمانی فواصل بین شاخکها در طول شبیه سازی اول..... ۷۴
- ۶.۱۱ : تغییرات زمانی فواصل بین شاخکها در طول شبیه سازی دوم..... ۷۵
- ۶.۱۲ : تغییرات زمانی فواصل بین شاخکها در طول شبیه سازی سوم..... ۷۶
- شکل ۶.۱۳ : RMSF المان پریفولدین $\beta 1$ در طول شبیه سازی های اول، دوم و سوم..... ۷۸

فهرست علائم اختصاری

<u>علامت</u>	<u>تعریف</u>
F_i	برآیند نیرو های وارد بر هر اتم شماره i [N]
M_i	جرم اتم شماره i [Kg]
r	فاصله دو اتم [nm]
V	تابع پتانسیل
K^b	ثابت پتانسیل پیوندی
K^θ	ثابت پتانسیل زاویه ای
K^ζ	ثابت پتانسیل خارج صفحه
q_i	بار الکتریکی روی اتم i
q_j	بار الکتریکی روی اتم j
ϵ_0	ضریب گذردهی خلاء
C	ثابت پتانسیل لنارد جونز
ζ_{pull}	جابجایی گروه کششی [nm]
ζ_0	کشش اولیه فنر [nm]
F_{pull}	نیروی کشش فنر [N]
K	ضریب سختی فنر
v_t	فاصله اتم در بازه زمانی t [nm]

فصل اول

مقدمه



۱.۱ نانو رباتیک

با پیشرفت علم و تکنولوژی در جهان، مرتباً بر تعداد واژه‌های تخصصی افزوده می‌شود. نانو تکنولوژی در واقع توصیفی از فعالیت‌ها در سطح اتم‌ها و مولکول‌ها می‌باشد که دارای کاربرد در دنیای واقعی و ملموس خواهد بود. یک نانومتر یک میلیاردم متر (10^{-9}) است. این مقدار حدوداً چهار برابر قطر یک اتم است. مکعبی با ابعاد ۲.۵ نانومتر ممکن است حدود ۱۰۰۰ اتم را شامل شود. کوچکترین آی سی‌های (IC) امروزی با ابعادی در حدود ۲۵۰ نانومتر در هر لایه به ارتفاع یک اتم، حدود یک میلیون اتم را در بردارند. در مقایسه یک جسم نانومتری با اندازه‌ای حدود ۱۰ نانومتر، هزار برابر کوچکتر از قطر یک موی انسان است. امکان مهندسی در مقیاس مولکولی برای اولین بار توسط ریچارد فاینمن^۱، برنده جایزه نوبل فیزیک مطرح شد. فاینمن طی یک سخنرانی در انستیتو تکنولوژی کالیفرنیا در سال ۱۹۵۹ اشاره کرد که اصول و مبانی فیزیک امکان ساخت اتم به اتم چیزها را رد نمی‌کند. وی اظهار داشت که می‌توان با استفاده از ماشینهای کوچک، ماشینهایی به مراتب کوچکتر ساخت و سپس این کاهش ابعاد را تا سطح خود اتم ادامه داد. همین عبارتهای افسانه وار فاینمن راهگشای یکی از جذابترین زمینه‌های نانو تکنولوژی یعنی ساخت روباتهایی در مقیاس نانو شد. در واقع تصور در اختیار داشتن لشکری از نانو ماشینهایی در ابعاد میکروب که هر کدام تحت فرمان یک پردازنده مرکزی هستند، هر دانشمندی را به وجد می‌آورد. در رؤیای دانشمندانی مثل جی استورس

^۱ R.Feynman

هال^۱ و اریک درکسلر^۲ این روباتها یا ماشینهای مونتاژکن کوچک تحت فرمان پردازنده مرکزی به هر شکل دلخواهی در می‌آیند. شاید در آینده‌ای نه چندان دور بتوانید به کمک اجرای برنامه‌ای در کامپیوتر، تخت خوابتان را تبدیل به اتومبیل کنید و با آن به محل کارتان بروید. خواص موجی شکل (مکانیک کوانتومی) الکترونهای داخل ماده و اثر متقابل آنها با یکدیگر از جابجایی مواد در مقیاس نانومتر اثر می‌پذیرند. با تولید ساختارهایی در مقیاس نانومتر، امکان کنترل خواص ذاتی مواد از جمله دمای ذوب، خواص مغناطیسی، ظرفیت بار و حتی رنگ مواد بدون تغییر در ترکیب شیمیایی بوجود می‌آید. استفاده از این پتانسیل به محصولات و تکنولوژیهای جدیدی با کارایی بالا منتهی می‌شود که پیش از این میسر نبود. نظام سیستماتیک ماده در مقیاس نانومتری، کلیدی برای سیستمهای بیولوژیکی است. نانوتکنولوژی به ما اجازه می‌دهد تا اجزاء و ترکیبات را داخل سلولها قرار داده و مواد جدیدی را با استفاده از روشهای جدید خوداسمبلی بسازیم. در روش خوداسمبلی به هیچ روبات یا ابزار دیگری برای سرهم کردن اجزاء نیازی نیست. این ترکیب پر قدرت علم مواد و بیوتکنولوژی به فرآیندها و صنایع جدیدی منتهی خواهد شد. بنا بر این ورود به این وادی نیازمند تکنولوژی اندازه گیری، دستکاری و مونتاژ در مقیاس ۱ تا ۱۰۰ نانومتر است. لذا به منظور دستاورد های ارزشمند در نانو تکنولوژی نیاز به تولید ابزار و ماشین های مولکولی اتوماتیک خواهد بود. مهندسی تولیدات مولکولی نیازمند به انجام توسط تجهیزات رباتیک دارد که با عنوان نانو رباتیک معرفی می شوند. نانو ربات اساساً یک ماشین قابل کنترل در مقیاس مولکولی است که از اجزا و المانهای نانو مقیاس ساخته شده است. شاخه علمی نانو رباتیک شامل مطالعه بر روی طراحی، ساخت، برنامه ریزی و کنترل ربات های نانو مقیاس می باشد. این تجهیزات می توانند ساختار های متفاوتی در مقیاس نانو را بسازند همچنین قابلیت تحریک، حس، علامت دهی، پردازش اطلاعات، هوشمندی و رفتار های گروهی و تهاجمی در مقیاس نانو را دارا هستند. بطور کلی رفتار های عملکردی نانو ربات ها را می توان به صورتهای کلی زیر دسته بندی کرد :

^۱ J.Storrs Hall

^۲ E.Drexler

۱- هوشمندی گروهی شامل غیر متمرکز و توزیعی

۲- رفتار های گروهی شامل انواع پیش امدی و تکاملی

۳- قابلیت مونتاژگری و خود سازماندهی در مقیاس نانو و نیز انجام عملیات های تعمیراتی

۴- قابلیت برنامه ریزی و پردازش اطلاعات برای اجرای فرایندهای کنترلی

۵- قابلیت برقراری ارتباط بین نانو و ماکرو

اما تفاوت‌های زیادی بین نانوروبوت‌ها و ماکروروبوت‌ها وجود دارد. این تفاوت در قوانینی است که بر دینامیک آنها حاکم است. ماکروروبوت‌ها در قلمرو مکانیک نیوتونی شکل می‌گیرند، حال آنکه قوانینی که نانوروبوت‌ها را تحت کنترل دارد از مکانیک کوانتومی مولکول پیروی می‌کند. با کاسته شدن از اندازه، نیاز به طراحی جدید ابزار وجود دارد، چون مقاومت‌های مختلف بین نیروها تغییر خواهد کرد. نیروی جاذبه ناچیز و امری بی‌اهمیت و از سوی دیگر نیروهای کشش سطحی و جاذبه واندروالس بسیار مهم خواهند شد. روبوت‌ها در اندازه‌ی نانو با محدودیت زیادی مواجه‌اند که منجر به عدم قطعیت زیادی درباره کار با آنها می‌شود. نانوروبوت‌ها با چشم غیرمسلح قابل رویت نیستند و این دستکاری و کار با آنها را بسیار دشوار می‌کند. تکنیک‌هایی نظیر تصویربرداری SEM^۱ میکروسکوپ الکترونی و AFM^۲ میکروسکوپ نیروی اتمی (میکروسکوپ نیروی پویشی) باید به کار گرفته شوند تا تصویری قابل تجسم از ساختار مولکولی این نانو روبوت‌ها به ما بدهند. این نانوماشین‌ها در محیطی متفاوت از محیطی که می‌شناسیم به کار گرفته می‌شوند و باید طراحی دقیق و کارآمدی از آن، در محیط مجازی صورت گیرد. زمان زیادی باید صرف کرد تا شبیه‌سازی رایانه‌ای این نانوروبوت‌ها صورت گیرد و رفتارهای آنها در محیط شبیه‌سازی شده مورد پیش‌بینی و ارزیابی قرارگیرد. این شبیه سازی ها می

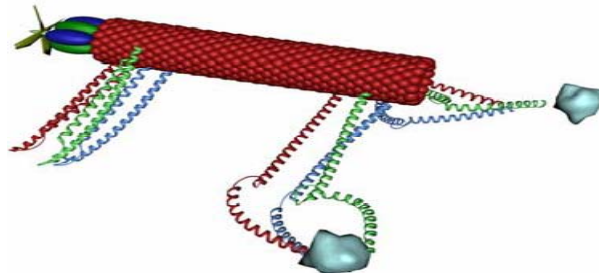
^۱ Scanning Electron Microscope

^۲ Atomic Force Microscopy

توانند عملکرد های در سطوح مختلف جزئیات رفتاری داشته باشند که این سطوح با سبک سنگین کردن دقت های فیزیکی مورد نیاز، ارزش محاسباتی، تعداد المانهای موجود و زمان شبیه سازی انتخاب می شوند [۱].

۱.۲ بیو نانو رباتیک

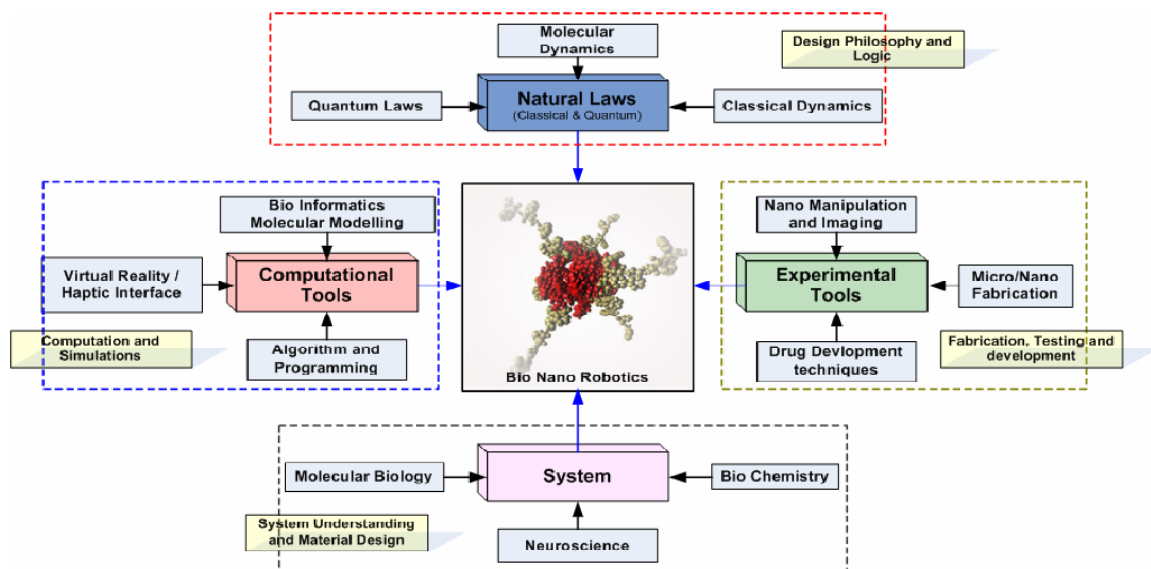
در این میان، گسترش علوم و تکنولوژی نانو و تعامل آن با بیوتکنولوژی، منجر به تولید و کاربرد واژه‌هایی چون بیونانوتکنولوژی در گفته‌ها و نوشته‌های محققان مختلف در سطح جهان شده است. تلفیق بیوتکنولوژی با فناوری نوظهور نانوتکنولوژی، مباحث جدیدی را بین محققان، هم در سطح دانشگاهی و هم در حوزه صنعت به وجود آورده است. نتیجه این تلفیق، ظهور "بیونانوتکنولوژی" به عنوان یک زمینه تحقیقاتی بین‌رشته‌ای است که به سرعت در حال رشد و توسعه است و با مقوله علم و مهندسی در سطح مولکول ارتباط دارد. بیونانوروبوت‌ها ماشین‌های قابل کنترلی در مقیاس نانو خواهند بود که از مولکول‌های زیستی تشکیل شده‌اند و به کمک مهار و تحت کنترل در آوردن خصوصیات بیولوژیک مولکول‌های زیستی نظیر پپتیدها (پروتئین) DNA، طراحی و ساخته خواهند شد. پروتئین‌ها و DNA به دلیل خصوصیات ساختاری ویژه که تابع جفت بازهای آدنین-گوانین و سیتوزین- تیمین است، قابلیت دارند تا یک موتور، یک اتصال‌دهنده یا مفصل مکانیکی، سنسور و ارسال‌کننده پیام باشند. اگر تمام این اجزا در کنار هم مونتاژ شود می‌توانند ماشین‌هایی با درجه بالایی از آزادی حرکت ایجاد کنند و خصوصیت‌هایی که در مقیاس ماکرو برای روبات‌ها وجود دارد را دارا باشند. توانایی‌هایی نظیر ایجاد حرکت، اعمال نیرو و ایجاد سیگنال یا پیام در پاسخ‌گویی به محرک‌های فیزیوشیمیایی خاص. بدیهی است که همه رفتارهای ماکروروبوت‌ها در این نانوروبوت‌ها نیز انتظار می‌رود.



شکل ۱.۱: بیو نانو ربات ساخته شده با مونتاژ المانهای طبیعی [۲]

بیو نانو ربات با اجزای کاملاً مصنوعی هنوز در دنیا ساخته نشده است. تمامی تلاشها و تحقیقات در این زمینه بر روی ماشین های مولکولی طبیعی و نیز شناسایی بررسی خواص المان های طبیعی قابل استفاده در ساخت بیو نانو ربات ها معطوف شده است. [۲]

بیو نانو رباتیک زمینه ای است که تلاش ها و همکاری بین علوم مختلف از قبیل فیزیک، شیمی، بیولوژی، علوم کامپیوتر و مهندسی را جهت نیل به اهداف مشترک طلب می کند. شکل ۱.۲ شاخه های مختلف علمی که در مطالعه بیو نانو رباتها درگیر می باشند را نشان می دهد.



شکل ۱.۲: بیو نانو رباتیک و علوم مختلف [۲]

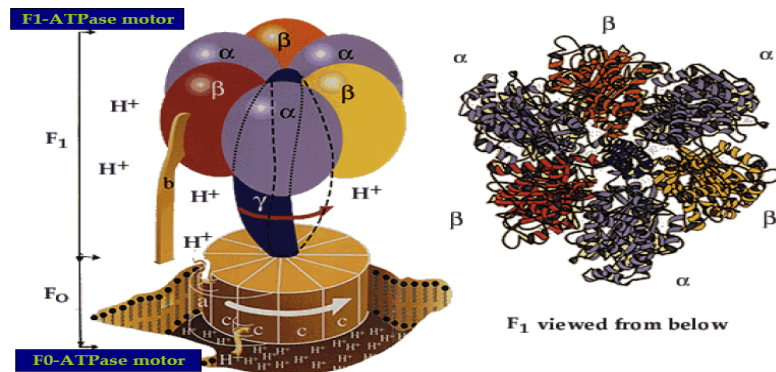
۱.۳ ماشین های مولکولی با المان های پروتئینی

بخش عمده ای از تحقیقات حال حاضر دنیا بر روی ربات های مولکولی متمرکز شده است. بررسی و کشف رفتار های آنها راهگشای پروژه های الهام از طبیعت در زمینه بیو نانو رباتیک خواهد بود. مادر طبیعت مالک مجموعه بسیار پیشرفته ای از ماشین های مولکولی می باشد که قرن هاست به فعالیت پیوسته خود در عرصه گیتی ادامه می دهند. دانش ما از آنها امکان کاربردشان در ساخت ماشین های مصنوعی را فراهم کرده است. این ماشین ها بر اساس المان های مختلف با پایه پروتئین، DNA و شیمیائی شناسایی شده اند. بررسی نزدیک سلول از طریق میکروسکوپ های مدرن، حرکت هایی از اجزا ساختمانی سلول را آشکار می کند که توسط موتورهای پروتئینی سازماندهی می شوند. این موتور های مولکولی همانند وسایل نقلیه ای هستند که در امتداد پلیمر های پروتئینی با صرف ATP^۱، وظایفی چون حمل بار و حرکت ماهیچه ای را به عهده دارد. در ادامه اشاره مختصری به تعدادی از موتور های مولکولی معروف طبیعی با پایه پروتئین که رفتار آنها تا حدودی شناسائی شده است خواهد شد.

۱.۳.۱ موتور مولکولی ATP synthase

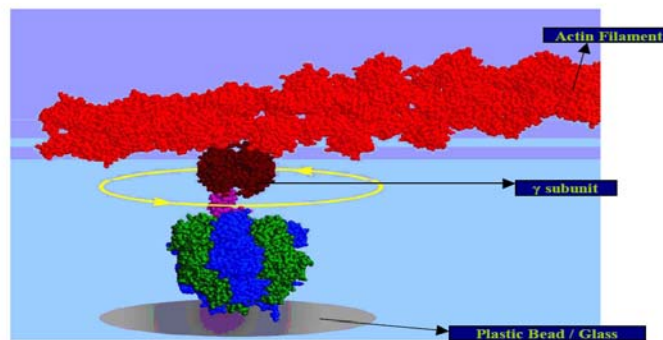
این آنزیم از دو بخش یا موتور عمل کننده F_0 ، F_1 و تعدادی زیر واحد (α ، β ، γ) تشکیل شده است. در بررسی فرآیند هیدرولی -سنتتازی این کمپلکس (همانطور که در شکل با نقطه چین مشخص شده است) مشاهده شد که در مواجهه با پروتون، جایگاه زیر واحد γ به طور محسوسی نسبت به جایگاه هگزامرهای $\alpha\beta_3$ حرکت می کند. مدل های زیادی برای توضیح این چرخش ارائه شده است و هنوز هم مکانیزم های دقیق این حرکت موضوع مورد بحث محققان است اما به هر ترتیب این ساختار به عنوان یک موتور چرخشی طبیعی شناخته شده است.

^۱ Adenosine Triphosphate(ATP)



شکل ۱.۳: ساختار پایه ATPase که جریان پروتون در دو موتور F_0 و F_1 را نشان می دهد

موتور F_1 با مصرف بسته های انرژی حرکت دورانی ایجاد می کند. به منظور محاسبه راندمان عملکرد این بیو نانو ربات طبیعی در کار تحقیقاتی انجام شده یک اکتین فیلمنت^۱ (پلیمر مارپیچ دو رشته با قطر حدود ۵ تا ۹ نانو متر) به واحد γ متصل شده که آغشته به مواد فلور سنت بوده است. در نتیجه امکان مشاهده حرکت دورانی فیلمنت در یک بازه زاویه ای معلوم و در یک جهت مشخص وجود حرکت بین γ با واحد های α و β را به اثبات رساند. همچنین با اندازه گیری تورک تولید شده و روابط موجود توانستند کار خروجی موتور F_1 را محاسبه کنند. این موتور می تواند به ازای مصرف یک مولکول ATP گشتاوری معادل 80 pN nm تولید کند که با در نظر گرفتن انرژی آزاد شده از یک ATP راندمان این موتور نزدیک به ۱۰۰ درصد می باشد [۲].

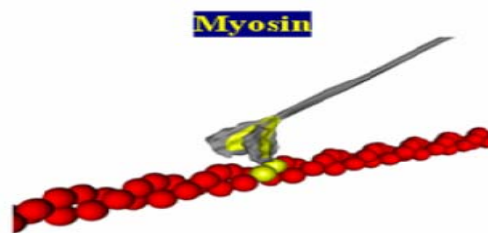


شکل ۱.۴: آزمایش تجربی بر روی F_1 -ATPase

^۱ Actin Filament

۱.۳.۲ موتور مولکولی خطی مایوسین^۱

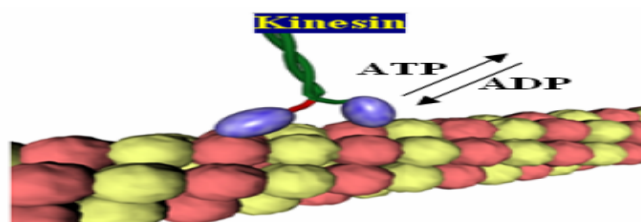
این موتور مولکولی دارای حرکت خطی بر روی اکتین فیلمنت ها می باشد و مبادرت به جابجایی محموله ها در طول آنها می کند [۴]. این موتور با استفاده از هیدرولیز بسته های ATP از انرژی آزاد شده استفاده می کند [۵]. همچنین در روند جابجایی از نیروی ناشی از تقابل خودش با فیلمنت نیز بهره می برد. مایوسین دارای دو سر عمل عملگر می باشد که در هر لحظه فقط یکی از آنها در تماس با مسیر حرکت است. در هر مرحله عملکرد (چسبیدن و جدا شدن از فیلمنت) این موتور حدود ۱۱ تا ۴۰ نانو متر به سمت جلو حرکت می کند.



شکل ۱.۵: موتور مولکولی مایوسین [۴]

۱.۳.۳ موتور مولکولی کینسین^۲

این موتور مبادرت به جابجایی محموله های سلولی در طول میکرو تیوب های پروتئینی با قطر حدود ۲۵ نانو متر می کند. مسیر حرکت آن از انتهای منفی میکرو تیوب به سمت مثبت می باشد. [۶] با اینکه مانند موتور مایوسین دارای دو سر عمل کننده می باشد اما پروسه کارکرد آن متفاوت است بطوریکه هر دو سر بطور هم زمان وارد عمل می شوند. این موتور با تبدیل بسته های انرژی ATP به ADP^۳ در هر سیکل کاری به مقدار خالص ۸ نانو متر محموله را جابجا می کند [۷].



شکل ۱.۶: موتور مولکولی کینسین [۷]

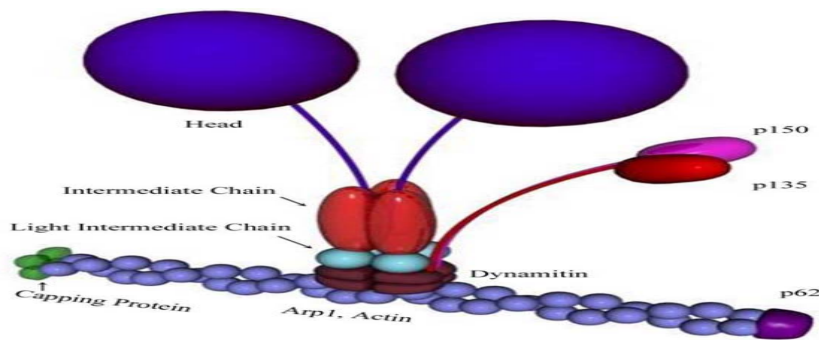
^۱ Myosin

^۲ Kinesin

^۳ Adenosine Diphosphate (ADP)

۱.۳.۴ موتور مولکولی داینئین ۱

این روبات مولکولی در سال ۱۹۵۶ معرفی و شناسائی شد [۸]. داینئین در دو فرم استاندارد مختلف می باشد. سیتوپلاسمیک (cytoplasmic) که مانند موتور های قبلی می تواند محموله های مختلفی را حمل کند. نوع دوم اکسنمال (axonemal) که قابلیت تولید حرکت خمشی در سایر المانهای پروتئینی را دارد. به دلیل ساختمان بسیار پیچیده این بیو نانو ربات طبیعی عملکرد دقیق آن هنوز هم شناخته شده نیست. از نظر ابعادی حدود ۱۰ برابر از دو نوع دیگر بزرگتر است [۹].



شکل ۱.۷: موتور مولکولی داینئین [۹]

۱.۳.۵ موتور های مولکولی با بنیان DNA

ساختار مولکول DNA به صورت یک دو رشته ای خطی و بدون انشعاب است. شناخت ما از طبیعت DNA ، به عنوان یک حامل اطلاعات ژنتیک است، اما این مولکول پیچیده قابلیت هایی فراتر از یک حامل را ایفا می کند. این مولکول می تواند بعنوان تبدیل کننده انرژی، سنسور و غیره استفاده شود و به خاطر انعطاف پذیری بسیار بالای آن قابلیت انجام کار مکانیکی را دارا نمی باشد اما همین انعطاف پذیری آن را برای استفاده در اتصالات مختلف در ساختار بیو نانو ربات ها مناسب کرده است.

^۱ Dynein

۱.۴ طراحی و کنترل بیو نانو رباتها

۱.۴.۱ طراحی سیستم های بیو نانو رباتیک

طراحی این سیستم ها نیازمند ورود به محدوده بسیار گسترده ای از علوم مختلف از دینامیک مولکولی کوانتومی گرفته تا تحلیل های سینماتیکی می باشد. استفاده از المانهای طبیعی مانند پروتئین ها در طراحی بیو نانو رباتها باعث پیچیدگی بسیار زیادی در این زمینه می گردد اما منافع و نیاز شاخه های مختلف علوم به استفاده از این نوع ربات ها نیز کاملاً ضروری و گسترده است. این عناصر طبیعی اولیه دارای تنوع بسیار عظیم و عملکرد بسیار متنوع در مقیاس نانو بوده و در نتیجه طراحی و ساخت بیو نانو ربات مصنوعی سازگار با شرایط اخیر بسیار پیچیده است. آنها در طول میلیونها سال از عمر طبیعت کاملاً به تکامل رسیده و دارای عملکرد بسیار دقیق و کارایی بالا می باشند. بعنوان مثال همانطور که قبلاً اشاره شد ربات مولکولی ATPase دارای راندمان نزدیک به ۱۰۰٪ می باشد. این راندمان بالا و تنوع گسترده در هیچ ماده دیگری که تا کنون شناخته شده است دیده نمی شود. همین اثرات شگرف پروتئین ها باعث کسترش تحقیقات دانشمندان بر روی این ماده طبیعی شده و دستاورد های زیادی را نیز به همراه داشته است. بنابراین انتخاب پروتئین ها بعنوان المان اولیه اصلی طراحی بیو نانو رباتها بسیار منطقی است. این طراحی کاملاً بر مبنای الهام از بیو نانو رباتهای طبیعی انجام خواهد شد. نقشه مسیر برنامه ریزی و روند پیش بینی شده برای نیل به هدف بر اساس شکل ۱.۸ تهیه شده است [۲].